

以体积为内部坐标数量平衡模型的 矩直接积分方法

苏军伟¹, 顾兆林², 李云¹

(1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安; 2. 西安交通大学人居环境与建筑工程学院, 710049, 西安)

摘要: 从体积为内部属性的数量平衡模型的一般形式出发, 提出以体积为内部坐标的矩直接积分求解方法. 该方法通过对实体数值密度分布引入高斯积分假设并进行矩变换, 将颗粒固有属性从数值密度函数中分离出来, 实现了实体属性及其实体分布的单独跟踪, 从而降低了计算量. 对各向同性系统的实体聚并、破碎和长大的模拟结果显示, 该方法精度较高、计算量小. 由于实体的数目及其体积在跟踪范围内, 该方法具有数目和体积的自守恒性. 以体积为内部属性的特点使其能够自动跟踪体积矩, 从而使得该方法更适合描述结晶系统的沉积现象. 考虑到离散相中体积和质量的密切关系, 该方法能够直接应用到不可压缩流动的化学反应的传质模拟过程.

关键词: 离散相; 矩直接积分方法; 数量平衡模型

中图分类号: TQ021 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)05-0621-04

Direct Quadrature Method of Moment on Characteristic Volume for Population Balance Equation

Su Junwei¹, Gu Zhaolin², Li Yun¹

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Human Settlements and Civil Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Direct quadrature method of moment with nominal volume of entities for a general population balance model (PBE) is proposed. In order to lower time consumption in the simulation, the entity intrinsic property is extracted from the numerical density function of entity distribution by Gauss quadrature approximation and moment transformation. The higher accuracy and the lower time consumption are validated in aggregation, breakage and growth cases in isotropic system. The number or volume of the entities is self-conservative due to their automatic tracking in the simulation. With volume as internal coordinates, volume moment can be tracked, too. As a result, it is preferable for describing precipitation in crystal system. This method enables to solve mass transfer of incompressible multi-fluid systems with chemical reactions according to the proportional relationship between the mass of the disperse phase and its volume.

Keywords: disperse phase; direct quadrature method of moment; population balance model

离散相系统广泛存在于自然界与工业领域, 在这些系统中, 实体(颗粒、气泡、液滴等)的分布不仅和空间位置有关, 还与实体本身的属性有关, 实体的微观行为可以是连续性行为(实体的长大)或者是跳

跃性行为(实体的聚并和破碎等). 对于一般意义的双流体模型很难描述这些行为, 故数量平衡模型便成为离散相系统的有效工具. 由于该模型本身的复杂性, 通常得不到解析解, 从而数值求解成为其主要

手段,数值解的优缺点可参见文献[1-2], Fan 等在矩方法的基础上提出了矩直接积分求解方法(DQ-MOM)^[2],该方法计算量较小,很容易向多属性坐标扩展,详细内容可参见文献[3].

矩直接积分求解法是以特征长度为内部属性坐标的,而使用较为广泛的分组法通常是以体积为内部属性,而且传统的描述离散相行为的微观频度模型(聚并率、破碎率等)大都以体积作为内部属性.由于 DQMOM 以特征长度作为内部属性坐标,从计算量和精度上考虑,矩的阶数通常取 3^[1-2,4],从而使得与结晶系统的沉积现象关系密切的体积矩 m_2 不在跟踪范围内,使得 DQMOM 对该矩的预测相对较差^[5].许多化学反应及其流动过程关系到实体的质量变化,且实体的质量与体积密切相连,因此有必要引入以体积为内部属性的矩直接积分求解方法.

1 数量平衡方程及其求解策略

1.1 数量平衡模型

以体积为内部属性的数量平衡模型可表示为

$$\frac{\partial f(V; x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_V f(V; x, t)) = S(V) \quad (1)$$

式中: $f(V; x, t)$ 是以体积 V 为内部属性的数值密度函数; $\langle u_i \rangle_V$ 是体积为 V 的实体的速度 u 在 x_i 方向的分量; $S(V)$ 为描述引起离散相体积发生变化的微观行为源项,它通常含有单重积分或多重积分. 方程(1)通常没有解析解.

1.2 实体分布的矩及实体特性参数

矩方法避免直接跟踪实体的分布函数的变化,而是跟踪其实体分布矩,矩的定义为

$$m_k(t) = \int_0^\infty V^k f(V; t) dV \quad (2)$$

k 取不同的值,矩有不同的物理含义,如 $k=0, m_0$ 表示实体总数量,即 $N_t = m_0(t)$; $k=1, m_1$ 表示实体的总体积, $V_t = m_1(t)$. 对于初始时刻实体分布的矩用 m_{0k} 表示. 多组分系统中常用的 Sauter 粒径 d_s , 表示为实体总体积和总面积的比值^[6]

$$d_s = \frac{\int_0^\infty f(V; t) V dV}{\int_0^\infty f(V; t) V^{2/3} dV} \quad (3)$$

而体积平均粒径表示为

$$d_v = \frac{\int_0^\infty f(V; t) V^{4/3} dV}{\int_0^\infty f(V; t) V dV} \quad (4)$$

对方程(1)进行矩变换,可以得到关于矩的微分方程,要求解还需额外的未知的矩^[7],因此方程(1)无法封闭,其应用受到限制. Fan 和 Fox 等对颗粒分布引入高斯积分假设,并提出 DQMOM^[2],然而该方法是以特征长度作为内部属性的. 下面介绍以特征体积作为内部属性的矩直接积分求解法(DQ-MOMV).

1.3 以体积为内部属性的矩直接积分方法

为了使方程(1)得以封闭,对实体的体积分布引入高斯积分假设

$$f(V; x, t) = \sum_{a=1}^N \omega_a \delta[V - V_a] \quad (5)$$

式中: ω_a 为权值; V_a 为特征体积; $\delta(V)$ 为脉冲函数; N 为高斯积分的阶数.

将方程(5)代入到方程(1),可得

$$\begin{aligned} & \sum_{a=1}^N \left[\frac{\partial \omega_a}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_a \omega_a}{\partial x_i} \right] \delta[V - V_a(x, t)] - \\ & \sum_{a=1}^N \left[\frac{\partial \omega_a V_a}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_a \omega_a V_a}{\partial x_i} \right] \delta'[V - V_a(x, t)] + \\ & \sum_{a=1}^N V_a \left[\frac{\partial \omega_a}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_a \omega_a}{\partial x_i} \right] \delta'[V - V_a(x, t)] = S(V) \end{aligned} \quad (6)$$

令 $\zeta_a = \omega_a V_a$, ζ_a 称为权值体积,有

$$\frac{\partial \omega_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_a \omega_a) = \phi_a \quad (7)$$

$$\frac{\partial \zeta_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle u_i \rangle_a \zeta_a) = \varphi_a \quad (8)$$

对于 a 取不同的值,方程(7)和(8)组成的是两个微分方程组. 如果考虑各向同性,上述两个方程左边的第 2 项将被略去.

对方程(6)进行简化

$$\begin{aligned} & \sum_{a=1}^N \phi_a \{ \delta[V - V_a(x, t)] + V_a \delta'[V - V_a(x, t)] \} - \\ & \sum_{a=1}^N \varphi_a \delta'[V - V_a(x, t)] = S(V) \end{aligned} \quad (9)$$

应用方程(2)对方程(9)进行矩变换,可得

$$(1-k) \sum_{a=1}^N V_a^k \phi_a + k \sum_{a=1}^N V_a^{k-1} \varphi_a = \int_0^\infty V^k S(V) dV \quad (10)$$

令

$$\bar{S}_k(t) = \int_0^\infty S(V) V^k dV \quad (11)$$

方程(11)是变换后数量平衡方程的源项,取决于离散相的微观行为的表述. 方程(10)实际上是一个线性方程组(k 取不同的值). 为了得到 ϕ_a 和 φ_a ($a=1,$

$\dots, N$ 共 $2N$ 个未知数,需要 $2N$ 个代数方程.为了简单起见,方程(10)分别取 $k=0, \dots, 2N-1$,得到矩阵

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{d} \quad (12)$$

式中

$$\mathbf{A} = [\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2]$$

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 \\ -V_1^2 & \cdots & -V_N^2 \\ \vdots & & \vdots \\ 2(1-N)V_1^{2N-1} & \cdots & 2(1-N)V_N^{2N-1} \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \cdots & 1 \\ 2V_1 & \cdots & 2V_N \\ \vdots & & \vdots \\ (2N-1)V_1^{2N-2} & \cdots & (2N-1)V_N^{2N-2} \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = [\phi_1, \dots, \phi_N, \varphi_1, \dots, \varphi_N]^T = \begin{bmatrix} \phi \\ \varphi \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\mathbf{d} = [\bar{S}_0, \dots, \bar{S}_{2N-1}]^T \quad (16)$$

将矩阵 $\mathbf{A}$ 求逆,然后和 $\mathbf{d}$ 相乘,可得

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{d} \quad (17)$$

2 数量平衡模型的源项处理及其方法的有效性验证

2.1 实体的聚并

所描述的问题不同,实体的聚并机理也不尽相同,但任何系统的聚并过程的微观模型均可以表示成统一形式^[4],不同系统的聚并率不同,对该统一形式引入高斯积分假设并进行矩变换可得

$$\bar{S}_k(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \omega_i \sum_{j=1}^N \beta_{ij} \omega_j (V_i + V_j)^k - \sum_{i=1}^N V_i^k \omega_i \sum_{j=1}^N \beta_{ij} \omega_j \quad (18)$$

式中: $\beta_{ij} = \beta(V_i, V_j)$ 是体积为 V_i 的实体与体积为 V_j 的实体的聚并率;右边各项的具体含义见文献[1].

取聚并率 $\beta(V, v) = C(V+v)$, C 是与实际多相体系有关的常数,实体的初始分布为

$$f(V) = N_0 \exp(-V) \quad (19)$$

式中: N_0 为初始实体数目.

对于各向同性情形,实体数目的变化有分析解^[6]

$$N(t) = N_0 \exp(-CN_0 V_0 t) \quad (20)$$

取 $C=1, N_0=1$,对方程(13)~(16)取 $N=3$,则对方程(15)的向量 $\boldsymbol{\alpha}$,需要 6 个初始矩.

将方程(19)代入到方程(2),取 $k=0, \dots, 5$,可以得到 6 个实体初始矩 $m_{0k} = \{1, 0.893, 0.9027, 1, 1.1906, 1.5046\}$. 利用 PD 算法^[4],根据实体的初始矩,得到对应的权值体积(特征体积)和权值,然后通过方程(18)得到方程(16)对应的源项向量,并构造方程(12)对应的矩阵 $\mathbf{A}$,利用方程(17)求得方程(7)、(8)的源项,进而利用龙格-库塔法求解这两个微分方程组得到下一时刻的权值和权值体积(特征体积).

实体数目的 DQMOMV 求解结果和解析解的结果如图 1 所示,可以看出两者一致性较好,最大相对误差为 0.0053,图中显示出了聚并过程中实体数目减少这一特性.

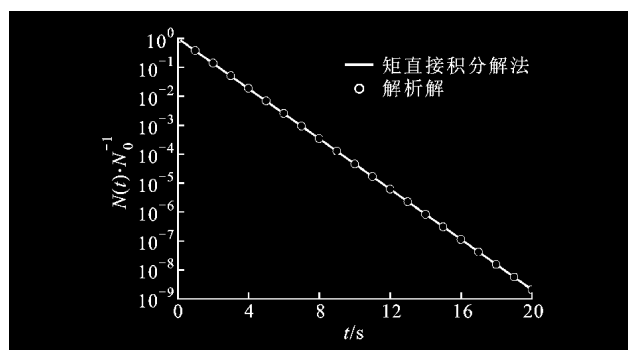


图1 纯聚并过程中实体的数目随时间的变化关系

2.2 实体的破碎

不同系统实体的破碎机理不尽相同,破碎率及其破碎后的实体分布亦不同.对所有破碎过程的微观模型可表达成统一形式^[4],引入高斯积分假设并进行矩变换,可得

$$\bar{S}_k(t) = \sum_{i=1}^N a_i \bar{b}_i^{(k)} \omega_i - \sum_{i=1}^N V_i^k a_i \omega_i \quad (21)$$

式中: $a_i = a(V_i)$ 为破碎率,主要由环境流体的特性决定; $\bar{b}_i^{(k)} = \int_0^\infty V^k b(V | V_i) dV$ 是体积为 V_i 的实体破碎后生成体积为 V 的实体的概率;右边各项的具体含义见文献[1].

取破碎率 $a(V) = V$,破碎子分布取均一分布, $\bar{b}_i^{(k)} = 2V_i^k / (k+1)$,初始分布采用

$$f(V) = N_0 \exp(-V/v_0) / v_0 \quad (22)$$

对于各向同性情形,实体分布有解析解^[8],对其进行矩变换可得

$$m_k(t) = N_0 v_0 k! \left(\frac{v_0}{1+v_0 t} \right)^{k-1} \quad (23)$$

取 $N_0 = 1 \text{ m}^{-3}$, $v_0 = 0.001 \text{ m}^3$, 对方程(12)取 $N=3$, 需要 6 个初始分布矩, 对方程(23)取 $k=0, \dots, 5$, $t=0$, 即可得到实体的初始分布 $m_{0k} = \{1, 1 \times 10^{-3}, 2 \times 10^{-6}, 6 \times 10^{-9}, 2.4 \times 10^{-11}, 1.2 \times 10^{-13}\}$.

实体分布的前 6 个矩随时间的变化关系如图 2 所示, 图中也给出了方程(23)的解析解, 两者吻合较好, 各矩最大相对误差为 0.003 6. 矩 m_1 随时间不变, 体现了破碎过程的质量守恒特性, 这点在矩直接积分法中是自动满足的, 而其他方法, 比如分组法, 则需要特殊处理. m_0 的变化体现了破碎过程中实体数目的增加特性.

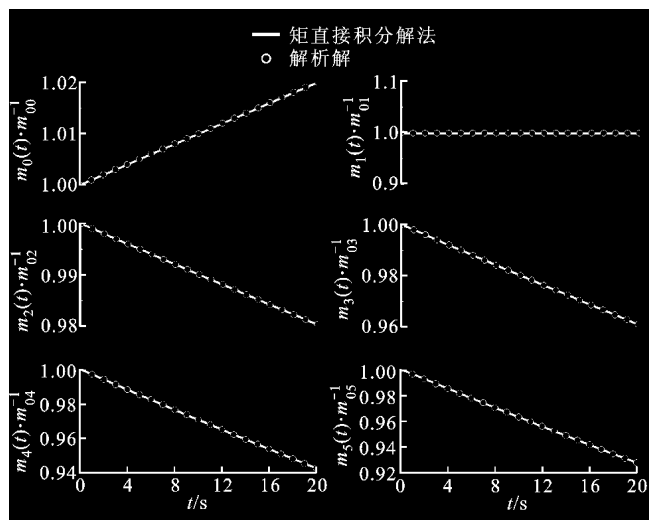


图2 破碎过程的前 6 个矩随时间的变化

2.3 实体的长大

实体长大行为存在于结晶及其沉积化学过程中, 变换后的数量平衡模型源项可以表示为

$$\bar{S}_k(t) = k \sum_{i=1}^N \omega_i G(V_i) V_i^{k-1} \quad (24)$$

式中: $G(V)$ 为实体的长大率, 取决于特定物理或化学过程.

取 $G(V) = G_0 V$, G_0 是与实体系统特性有关的一个常数, 在各向同性情形下有如下解析解

$$m_k(t) = m_{0k} \exp(k G_0 t) \quad (25)$$

$k = 0, \dots, 2N-1$

实体的初始分布为

$$f(V) = N_0 \exp(-V) \quad (26)$$

取 $G_0 = 1$, 高斯积分的结点数 $N=3$.

d_s 和 d_v 随时间的变化关系如图 3 所示, DQ-

MOMV 的结果和解析解的一致性较好, 同时重现了实体的长大过程.

实体分布的前 6 个矩随时间的变化关系如图 4 所示. 图中也给出了方程(25)的解析解, DQMOMV 的结果与解析解的结果吻合较好, 各矩最大相对误差在 10^{-5} 以内, m_0 的变化关系体现了实体长大过程中的数目守恒特性, 而对于其他方法, 如分组法, 则需要特殊的处理.

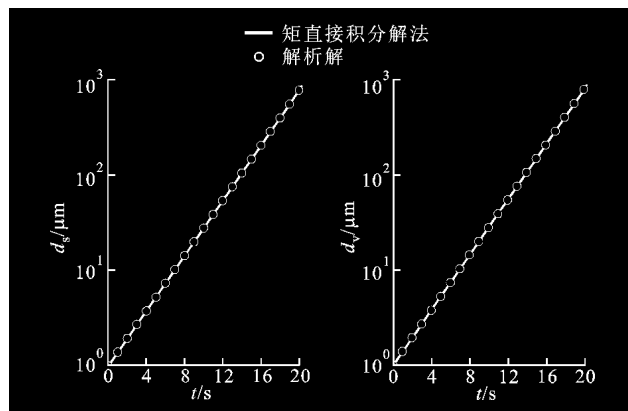


图3 实体分布的 d_s 和 d_v 随时间的变化

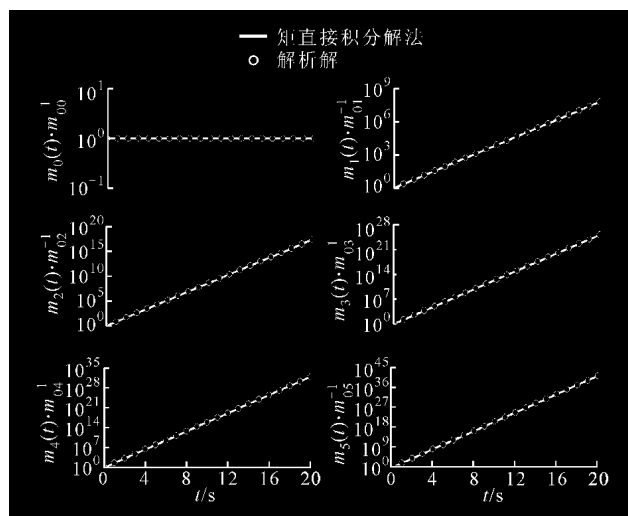


图4 实体长大过程的前 6 个矩随时间的变化

3 结 论

本文提出了 DQMOMV, 使得数量平衡模型中的以体积为内部属性的传统微观频度模型直接应用于矩直接积分求解, 无需再向特征长度转化. 不可压缩流动体积和质量有密切的关系, 本文提出的方法可以直接将其中的体积转变为质量应用于化学反应的传质过程.

本文阐述了实体长大、聚并、破碎等微观行为的数学模型在该方法中的处理, 并对聚并、破碎、实体长大过程进行了模拟计算, 结果表明对于聚并、破碎

及其实体的长大过程,DQMOMV的结果与解析解吻合较好,计算量较小.

进一步的工作需要将该方法与CFD耦合并应用到具体的离散相系统中.

参考文献:

- [1] 苏军伟,顾兆林,李云. 各向同性颗粒系统数量平衡方程直接矩积分求解法的研究[J]. 化学反应工程与工艺, 2006, 22(4):300-306.
Su Junwei, Gu Zhaolin, Li Yun. Study on direct quadrature method of moment for population balance equation in isotropic particle system[J]. Chemical Reaction Engineering and Technology, 2006, 22(4):300-306.
- [2] Fan Rong, Marchisio M L, Fox R O. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas solid fluidized beds [J]. Powder Technology, 2004, 139 (1): 7-20.
- [3] 苏军伟,顾兆林,李云. 颗粒数量平衡方程的直接矩积分求解[C]//2006年中国工程热物理学会多相流学术会议论文集:上. 重庆:中国工程热物理学会, 2006: 537-546.
- [4] Marchisio D L, Vigil R D, Fox R O. Quadrature method of moments for aggregation breakage processes [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2003, 258 (2): 322-334.
- [5] Barrett J C, Webb N A. A comparison of some approximation methods for solving the aerosol general dynamic equation [J]. Journal Aerosol Sci, 1998, 19 (1/2):31-39.
- [6] Bove S. Computational fluid dynamics of gas-liquid flows including bubble population balances [D]. Aalborg, Denmark: Aalborg University, Faculty of Engineering and Science, 2005.
- [7] Diemer R B, Olson J H. A moment methodology for coagulation and breakage problems, part 2: moment models and distribution reconstruction [J]. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2211-2228.
- [8] Alopaeus V, Laakkonen M, Aittamaa J. Numerical solution of moment-transformed population balance equation with fixed quadrature points[J]. Chemical Engineering Science, 2006, 61(15): 4919-4929.

(编辑 荆树蓉)